

(19)



JAPANESE PATENT OFFICE

PATENT ABSTRACTS OF JAPAN

(11) Publication number: **08235242 A**

(43) Date of publication of application: **13.09.96**

(51) Int. Cl.

G06F 17/50

G06F 17/17

// G01N 21/27

(21) Application number: **07062075**

(71) Applicant: **JASCO CORP**

(22) Date of filing: **24.02.95**

(72) Inventor: **IWATA TETSUO
KOSHOBU JUN**

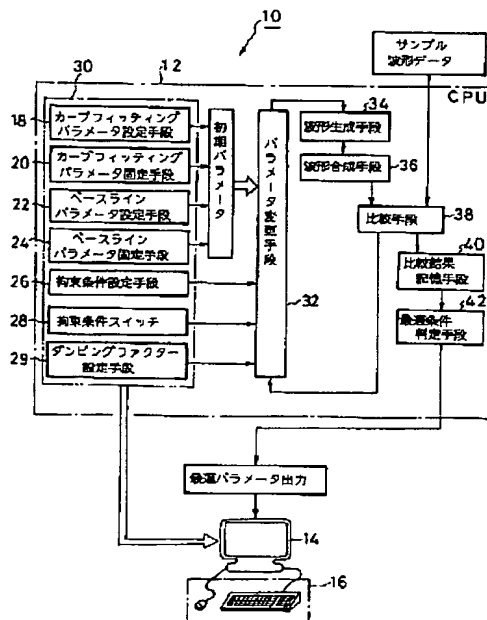
(54) CURVE FITTING OPTIMIZATION METHOD

(57) Abstract:

PURPOSE: To visually and easily set curve fitting optimization for handling many parameters

CONSTITUTION: The method for separating combined waveforms for which plural waveforms are combined into respective component waveforms if provided with a parameter setting process 18 capable of displaying and changing initial parameters for stipulating plural temporary component waveforms on a display, a parameter fixing process 20 for specifying a part of a switch group displayed on the display in one-to-one correspondence with the displayed plural parameters by the change of the physical form of the switch and fixing the plural pieces of the parameters and a parameter changing process 32 for successively changing the parameters other than the fixed ones and searching the parameters by which the synthesized waveform of the plural temporary component waveforms is most approximate to the combined waveform.

COPYRIGHT: (C)1996,JPO



(19) 日本国特許庁 (J P)

(12) 公開特許公報 (A)

(11) 特許出願公開番号

特開平 8 - 2 3 5 2 4 2

(43) 公開日 平成 8 年 (1 9 9 6) 9 月 1 3 日

(51) Int. Cl. ⁶	識別記号	庁内整理番号	F 1	技術表示箇所
G06F 17/50			G06F 15/60	680 A
17/17			G01N 21/27	Z
// G01N 21/27			G06F 15/353	
			15/60	638

審査請求 未請求 請求項の数 2 F D (全 1 2 頁)

(21) 出願番号 特願平 7 - 6 2 0 7 5

(22) 出願日 平成 7 年 (1 9 9 5) 2 月 2 4 日

(71) 出願人 0 0 0 2 3 2 6 8 9

日本分光株式会社

東京都八王子市石川町 2 9 6 7 番地の 5

(72) 発明者 岩田 哲郎

東京都八王子市石川町 2 9 6 7 番地の 5

日本分光株式会社内

(72) 発明者 小勝負 純

東京都八王子市石川町 2 9 6 7 番地の 5

日本分光株式会社内

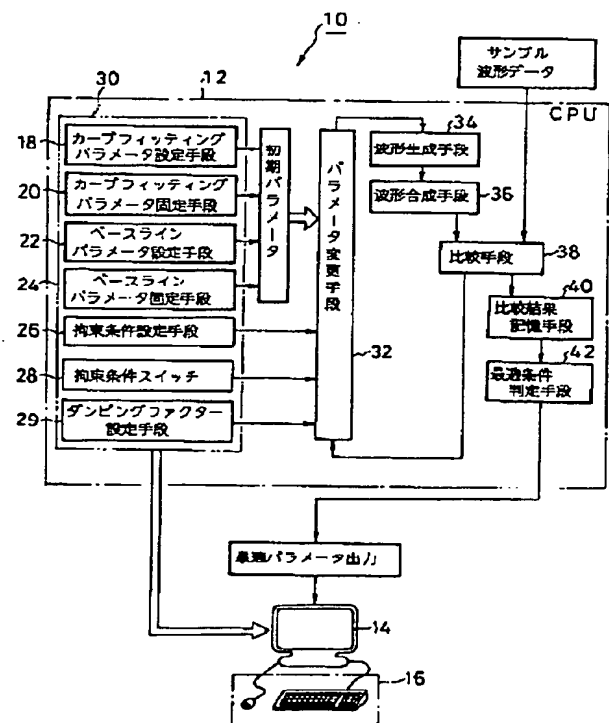
(74) 代理人 弁理士 岩橋 祐司

(54) 【発明の名称】 カーブフィッティング最適化方法

(57) 【要約】

【構成】 複数の波形が複合された複合波形を、各コンポーネント波形に分離する方法において、複数の仮コンポーネント波形を規定する初期パラメータをディスプレイ上に表示し、かつ変更可能なパラメータ設定工程 1 8 と、前記表示された複数のパラメータと 1 対 1 で対応して、ディスプレイ上に表示させたスイッチ群のうち一部を、そのスイッチの物理的様態の変化により指定して、前記複数のパラメータを固定するパラメータ固定工程 2 0 と、前記固定された以外のパラメータを順次変更し、前記複数の仮コンポーネント波形の合成波形が、前記複合波形と最も近似するパラメータを探索するパラメータ変更工程 3 2 と、を備えたことを特徴とするカーブフィッティング最適化方法。

【効果】 多くのパラメータを扱うカーブフィッティング最適化の設定を視覚的にかつ容易に行うことが可能となる。



【特許請求の範囲】

【請求項 1】 複数の波形が複合された複合波形を、各コンポーネント波形に分離する方法において、

複数の仮コンポーネント波形を規定する初期パラメータをディスプレイ上に表示し、かつ変更可能なパラメータ設定工程と、

前記表示された複数のパラメータと 1 対 1 で対応して、ディスプレイ上に表示させたスイッチ群のうち一部を、そのスイッチの物理的様態の変化により指定して、前記複数のパラメータを固定するパラメータ固定工程と、前記固定された以外のパラメータを順次変更し、前記複数の仮コンポーネント波形の合成波形が、前記複合波形と最も近似するパラメータを探索するパラメータ変更工程と、

を備えたことを特徴とするカーブフィッティング最適化方法。

【請求項 2】 請求項 1 記載のカーブフィッティング最適化方法において、前記パラメータに対するパラメータの複数の毎の制約条件をディスプレイ上に設定表示する工程と、前記パラメータに対する制約条件のオン、オフをディスプレイ上に設定表示する工程とを備えたことを特徴とするカーブフィッティング最適化方法。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【産業上の利用分野】 本発明は最適化方法、特にパラメータ設定・固定方法の改良に関する。

【0002】

【従来の技術】 各種被処理対象の特性を複数のパラメータで表現するため、仮パラメータの設定を行い（初期パラメータ値の設定）、該仮パラメータの内容を順次変更して最も特性をよく表すパラメータ群を得る、いわゆる最適化方法が周知である。たとえば、定量定性分析の分光測定などの分野においては、一つの試料中に含まれる複数の成分が、それぞれ異なる吸光特性を有することが多く、この場合各成分は単一のピークを有する波形であったとしても、それらが重なると多数のピークを有する複雑な複合波形となり、このままでは成分ごとの定量定性分析を行うことができない。また、一つの化合物であっても、その構造上複数の光吸収部位が存在する場合、それぞれの吸収部位に応じた吸光特性を分離・解析すれば、構造の特定を行い得る。

【0003】 そこで、従来よりこのような複合波形をコンポーネント波形に分離する波形分離方法が各種開発されている。たとえば、前記定量定性分析のために、カーブフィッティング法あるいはカーブリゾルピング法が広く用いられている。これらの方法では、複雑なスペクトル波形は、複数の孤立した波形成分に分解される。コンポーネント波形形状は、簡単な解析関数で表現できるローレンツやガウス波形などが多用されており、これら複数のコンポーネント波形のパラメータ（ピーク位

置、ピーク高さ、半値幅）を逐次反復変化させながら合成重畳し、取得したスペクトルに最小自乗規範で一致させていくのである。

【0004】

【発明が解決しようとする課題】 このように、カーブフィッティング法は非線形最適化問題の一つであるので、最適な初期パラメータ値を与えなければならない。もしこのパラメータの値の与え方が悪いと収束に長時間を要したり、場合によってはまったく異なった解を与えてしまう。これはパラメータ空間内で、各反復毎に更新されるパラメータの値がローカルミニマムに陥ってしまうからである。このように初期パラメータの値の設定は重要であるが、特別な先見情報がない場合には、通常微分波形から求めている。又、定量の目的でフーリエセルフデコンボリューション（FSD）を施して、初期パラメータを推定し易くし、その後カーブフィッティングを適用する手法も提案されている。

【0005】 しかしながら、このようなカーブフィッティングに代表される最適化プログラムにおいては、数多くのパラメータや各々のパラメータに付随する条件が多く存在するので、それらの細かな制御が要求される。たとえばカーブフィッティングを例に挙げると、適合させる関数形を適当な解析関数（たとえばローレンツ関数、ガウス関数など）に決めた場合、その高さ、位置、幅の 3 つに適合させる関数の個数（ピーク個数）を掛けた数だけのパラメータが存在する。又、ベースラインを考慮すると、それに関するパラメータがさらに追加されることとなる。たとえば、一次の直線ベースラインの場合には、直線の傾きと切片がパラメータに追加される。そして、通常カーブフィッティングを実行する場合には、これらのパラメータを全て動かしながら、最適解を捜す。しかしながら、実際のカーブフィッティングにおいては、これら多くのパラメータのうちの一部だけを固定して残りのパラメータあるいは特定のパラメータだけを動かしたい場合もある。例えば、各ピークの位置情報が既知で、その信頼性が高いということがあらかじめ分かっている場合には、この位置パラメータは各反復毎に動かさず、固定しておいた方が、収束時間が短くて済み、収束した解の精度も高い。

【0006】 しかしながら、従来のカーブフィッティングプログラムでは、特定のパラメータだけを動かすには、そのためのプログラムを独立に作成する必要があった。更にはもっと一般的に数多くのパラメータのうち位置情報以外の任意の特定の数のパラメータを固定し、残りのパラメータだけを動かしたいという要求が実際のカーブフィッティングでは生じるが、従来のプログラムでは、この要求に十分に答えることができていなかった。その理由はパラメータの固定のオン、オフの条件設定の操作が複雑になるためであった。又、プログラムの使用者にとっても、いずれのパラメータを固定したのかが、

一目瞭然には分かりにくくなっていた。

【0007】一方、各パラメータに付随する条件については、例えば、ピークの高さや幅は負になることはありえないので、反復の途中でこれらが負になれば、適当な規範に従ってこれを許容領域内に強制的に戻すような措置も必要となる。この問題はそのパラメータ非負の拘束条件を課すことで解決できるが、もし全てのパラメータに対して適切な先見情報が得られれば、このような拘束条件を適宜に課すことが望ましい。さらには、何回かの反復の後に、高さや幅のパラメータが上記の拘束条件の下限から出てしまうような場合には、その波形は適合させることを断念して、全体としては適合させるべきピークの個数を自動的に減少させることが望ましい問題もある。しかし、従来のプログラムでは数多くのパラメータの各々に対して、適切な拘束条件を自由に課すことが難しかった。この理由はパラメータのオン、オフの問題の場合と同様、パラメータに対して上限、下限の拘束条件を独立に設定する（拘束条件を導入した場合をオン、拘束条件を導入しない場合をオフとする）と、どのパラメータに対してどのような拘束条件を課したのか、どのパラメータの拘束条件をオンにしたかが、プログラムの使用者に対して一目瞭然には分かりにくくなるためであった。

【0008】適合波形の形状に関しても、フォークト波形がスペクトル線には一番良いという報告もあるが、簡便にはローレンツとガウスの和波形が適当である。しかし、この場合、一つのピークに対してローレンツとガウスを独立に扱くと、パラメータの個数は6個となり、設定の煩雑さが増大し、収束時間も長くなってしまう。さらに、最適化アルゴリズムにおいてはダンピングファクターなど、いろいろな制御パラメータの細かな制御が必要となり、これらがプログラムの使用者に対して明確に示される必要があった。しかしながら、従来の最適化手法をコンピュータにより運用する際には、これらパラメータの明確且つ効率的な設定及び表示を行うことができなかった。本発明は前記従来技術の課題に鑑みなされたものであり、その目的は多くのパラメータの設定、固定や拘束条件のオン、オフの場合にはその範囲を明確且つ簡易に行うことのできる最適化方法を提供することにある。

【0009】

【課題を解決するための手段】前記目的を達成するために本発明にかかる最適化方法は、前記複数のパラメータをディスプレイ上に表示し、かつ変更設定可能な初期パラメータ設定工程と、前記表示された複数のパラメータと1対1対応させたマトリックス状のスイッチを用意し、そのスイッチの物理的な形状、又は色などの変化により一部を指定し、固定可能なパラメータ固定工程と、を備えたことを特徴とする。また、前記パラメータに対応する拘束条件の範囲をディスプレイ上に表示し、かつ

変更設定可能な拘束条件範囲設定工程と、前記拘束条件のうち一部を指定し、オン可能な拘束条件設定工程と、を備えたことを特徴とする。

【0010】また、本発明の最適化方法をカーブフィッティングに適用する場合、複数の仮コンポーネント波形を規定するパラメータとそのパラメータに付随する拘束条件とをディスプレイ上に表示し、かつ変更可能なパラメータ設定工程と、前記表示された複数のパラメータのうち一部を指定して固定するパラメータ固定工程と、前記拘束条件のオン、オフ設定工程と、前記固定された以外のパラメータを順次変更し、前記複数の仮コンポーネント波形の合成波形が、前記複合波形と最も近似するパラメータを前記拘束条件の範囲内で探索するパラメータ変更工程と、を備えることが好適である。

【0011】

【作用】本発明にかかる最適化方法によれば、前述したように多くの最適化パラメータと拘束条件を画面上で視覚的に容易に設定、固定をすることができる。

【0012】

【実施例】以下、図面に基づき本発明の好適な実施例を説明する。図1には本発明の一実施例にかかるカーブフィッティング用の最適化装置のブロック図が示されている。同図において、最適化装置10は、コンピュータ本体12と、ディスプレイ14と、マウス、キーボードなどの手動入力手段16とよりなる。そして、コンピュータ本体12には、カーブフィッティングパラメータ設定手段18、カーブフィッティングパラメータ固定手段20、ベースラインパラメータ設定手段22、ベースラインパラメータ固定手段24、拘束条件設定手段26、拘束条件スイッチ28及びダンピングファクター設定手段29を含む。そして、これらの手段18～29は、前記ディスプレイ14への設定内容表示、該ディスプレイ14上でのカーソル指定及びマウスクリック、キーボード入力による編集内容取り込みを行う機能を備えた画面上スイッチ部30を構成している。

【0013】ここで、前記カーブフィッティングパラメータ設定手段18は、被処理対象となるサンプル波形データに対して適合するであろう複数の仮コンポーネント波形を規定する波形パラメータを設定する。また、前記カーブフィッティングパラメータ固定手段20は、前記設定手段18により設定された複数の仮パラメータのうち、任意のパラメータを固定する。ベースラインパラメータ設定手段22は、前記サンプル波形データのベースラインを規定するパラメータを設定する。ベースラインパラメータ固定手段24は、前記設定手段22により設定されたベースラインパラメータのうち、任意のパラメータを固定する。

【0014】拘束条件設定手段26は、前記カーブフィッティングパラメータ設定手段18により設定された仮コンポーネント波形パラメータ、及びベースラインパラ

メータ設定手段 2 2 により設定されたベースラインパラメータの最大、最小値などを規定し、カーブフィッティング作業により当初設定されたパラメータが変動する範囲を規制することが出来る。なお、拘束条件スイッチ 2 8 は、この拘束条件設定手段 2 6 により設定された拘束条件を作動させるか否かを指令する。ダンピングファクター設定手段 2 9 は、前記設定手段 1 8、2 2 で設定されたパラメータをカーブフィッティング作業により変更させる際、その一回あたりの修正量を規定する。

【0015】又、コンピュータ本体 1 2 は、パラメータ変更手段 3 2、波形生成手段 3 4、波形合成手段 3 6、比較手段 3 8、比較結果記憶手段 4 0、及び最適条件判定手段 4 2 を備える。そして、パラメータ変更手段 3 2 は、前記カーブフィッティングパラメータ設定手段 1 8、及びベースラインパラメータ設定手段 2 2 により設定された初期パラメータを読みだし、前記固定手段 2 0、2 4 により固定された固定パラメータ以外の仮パラメータを順次変更する。なお、前記拘束条件スイッチ 2 8 が ON の場合には、拘束条件設定手段 2 6 により拘束されたパラメータはその拘束条件範囲内での変更とする。

【0016】又、波形生成手段 3 4 は、前記パラメータ変更手段 3 2 から順次出力される仮パラメータに基づき、仮コンポーネント波形を生成する。なお、通常一つの複合波形に対して複数のコンポーネント波形が対応するから、波形合成手段 3 6 は、前記波形生成手段 3 4 から送られてくる複数のコンポーネント波形の一群を合成する。該波形合成手段 3 6 により合成された合成波形は、比較手段 3 8 によって被処理対象であるサンプル波形データと比較され、最小自乗規範で前記合成波形をサンプル波形データに一致させるように、各種のパラメータの修正量を設定し、その情報はパラメータ変更手段に送られる。一方で、該合成波形とサンプル波形データとの差分（残差）が、当該合成波形の各コンポーネント波形のパラメータとともに、比較結果記憶手段 4 0 に記憶される。

【0017】そして、所望の繰り返し回数、パラメータを変更させてのカーブフィッティングが行われた後、最適条件判定手段 4 2 により残差の最も小さい合成波形の各コンポーネント波形のパラメータがディスプレイ 1 4 に出力される。なお、ディスプレイ 1 4 には、画面切り替えにより前記最適コンポーネント波形群のパラメータのみならず、該コンポーネント波形、その合成波形とともに、前記サンプル波形、残差を図示することも可能である。

【0018】図 2 には本実施例にかかるカーブフィッティング最適化装置 1 0 のディスプレイ 1 4 表示画面の一例が示されている。同図において、画面 5 0 には、前記各手段 1 8 ~ 2 9 に対応したカーブフィッティング初期パラメータ設定エリア 5 2、カーブフィッティングパラ

メータ固定エリア 5 4、ベースライン初期パラメータ設定エリア 5 6、ベースラインパラメータ固定エリア 5 8、拘束条件設定エリア 6 0、拘束条件スイッチ 6 1 及びダンピングファクター設定エリア 6 2 を備える。

【0019】そして、各設定エリア 5 2、5 6、6 0、6 2 は、それぞれ設定値表示ウインドー（たとえばエリア 5 2 のウインドー 6 4）、及びその設定値の増加、減少を行うインクリメントスイッチ（デクリメントスイッチ）（たとえばエリア 5 2 のスイッチ 6 6）を備えている。そして、各インクリメントスイッチないしデクリメントスイッチに図示を省略したカーソルを合わせ、クリックすることで初期設定値の変更を行うことができる。本実施例において、カーブフィッティングに用いられる仮コンポーネント波形は、ローレンツ波形とガウス波形の合成波形であり、且つ 5 本の場合を図示している。コンポーネント波形 $y(v)$ は、次式数 1 で表される。

【0020】

$$\text{【数 1】 } y(v) = (1 - \beta) \cdot h / \{1 + (v - \mu)^2 / \omega^2\} + \beta \exp\{-\ln 2 (v - \mu)^2 / \omega^2\}$$

ここで、 $\beta = 0$ の場合にはローレンツ波形を示し、 $\beta = 1$ の場合にはガウス波形を示すこととなる。そして、前記カーブフィッティングパラメータは、ピーク高さ (HEIGHT)、位置 (POSITION)、半値幅 (HWHM)、及び前記 β (BETA) を用いている。なお、エリア 5 4 には、黒色に反転しているスイッチが存在せず、前記エリア 5 2 の初期設定値はいずれもパラメータ変更手段 3 2 により可変である。また、本実施例において、ベースライン $Y(v)$ は、二次式以下であることを前提に次式数 2 で表される。

【0021】

$$\text{【数 2】 } Y(v) = a X^2 + b X + c$$

そして、 a 、 b 、 c をそれぞれエリア 5 6 のウインドー 6 8、7 0、7 2 の設定値により規定する。なお、本実施例においては a 、 b 、 c のいずれも「0.00」であり、ベースラインが存在しないことを前提にしている。また、エリア 5 8 のスイッチはいずれも黒色に反転しており、これらベースラインに関する設定値 a 、 b 、 c はパラメータ変更手段 3 2 による変更は行われない。

【0022】本実施例において、拘束条件設定エリア 6 0 は、縦 2 列のスイッチ群をそなえ、左列は各設定値の最小値、右列は各設定値の最大値を規定する。同図においては、ベースラインパラメータはいずれも最小値、最大値とも 0.00 である。これは前述した通り、ベースラインには変動がなくしかもパラメータ変更手段 3 2 による変更も行わないことを意味している。一方、カーブフィッティングパラメータである Height, Position, HWHM, Beta は、いずれも最小値が「0.00」であり、しかも最大値は Height, Position が 1000、HWHM は 100、Beta は 1.00 であり、これはいずれも各値で考えられる実質的な最大値である。

【0023】なお、拘束条件スイッチ61は黒色に反転しON状態にあり、これらの拘束条件はパラメータ変更手段32によるパラメータ変更の際して変更範囲を規制する。本実施例において、ダンピングファクター設定エリア62では、前記カーブフィッティングパラメータのダンピングファクターが規定されており、前記パラメータ変更手段32によるパラメータ変更の際しての修正量

が決定される。同図において、ウィンドー74が1回目、ウィンドー76が2回目…ウィンドー80が4回目で、5回目以降は4回目の値と同一に固定される。

【0024】以上のように条件を元に、図3に示すサンプル波形を処理した。同図に示すサンプル波形W₁は、下記のコンポーネント波形を合成したものである。

【表1】

コンポーネント波形	Height	Position	HWHM	Beta
①	0.30	40.00	5.00	0.00
②	0.70	53.00	9.00	0.50
③	0.60	64.00	5.00	0.00
④	0.80	75.00	8.00	0.10
⑤	0.40	84.00	6.00	0.30

【0025】このサンプル波形データW₁に対して前記図2のカーブフィッティング初期パラメータ設定エリア52に示す条件に基づき、カーブフィッティングを行った結果、図3に示す推定コンポーネント波形①'～⑤'が得られ、図4の結果表示エリア82、84に示すように推定コンポーネント波形と表1に示すコンポーネント波形はほぼ完全に一致する結果が得られた。すなわち、図3上部には推定コンポーネント波形①'～⑤'の和合成を行ったものと、原サンプル波形との差分が示されており、同図より残差Rは殆ど零であることが明かである。また、図4の推定カーブフィッティングパラメータ表示領域82及び推定ベースラインパラメータ表示領域84の値も、それぞれ前記表1の値と一致している。

【0026】以上のように、本実施例にかかる最適化装置によれば、カーブフィッティングの際してのきわめて多くのパラメータを画面上に表示しつつ、その設定及び固定を行うことが可能となり、所望のカーブフィッティング作業の設定を容易に行うことができる。次に、同様の原サンプル波形を用い、カーブフィッティングパラメータの一部を固定して作業を行った例を、図5及び図6に基づき説明する。

【0027】図5と前記図2を対比させると理解できるように、カーブフィッティングパラメータ設定エリア52に設定された値自体は両者共通であるが、パラメータ固定エリア54において、設定コンポーネント波形①'のHeight、Beta、波形②'のHeight、波形③'のPosition、Beta、波形④'のPositionがいずれも黒色に反転して固定されている。これらの固定したパラメータの値は、合成波形W₁の各コンポーネント波形の真値に設定されている。この条件でカーブフィッティング作業を行った結果が同図5の推定カーブフィッティングパラメータ表示領域82及び推定ベースラインパラメータ表示領域84に示され、さらにその結果を図示したのが図6である。

【0028】図5、6の残差Rの表示からだけではあまり明かではないが、たとえば未知試料について、特定成分の存在がすでに確認されている場合などには、その確認部分を固定することにより、正確かつ高速なカーブフィッティングを行うことができる。図7には本発明の第二実施例にかかるカーブフィッティング最適化装置の概略構成が開示されており、前記図1と対応する部分には同一符号を付し、説明を省略する。同図に示す装置は、反復回数設定手段100と、反復回数カウント手段102を備えている。

【0029】そして、反復回数設定手段100により設定された値は、前記反復回数カウント手段102に入力される。又、前記比較手段38の出力も反復回数カウント手段102を介してパラメータ変更手段32に入力されている。そして、同一数のピーク（同一数の仮コンポーネント波形）について、前記反復回数設定手段100で設定された回数だけカーブフィッティングを反復した後に、波形パラメータの高さと幅が前記拘束条件設定手段26で設定された閾値以下となると、前記仮コンポーネント波形の個数を一つ減らす。以上のように、仮コンポーネント波形の個数を順次減らしていくことにより、想定される多くの仮コンポーネント波形を予め登録しておいても、最適のコンポーネント波形のみを選択することが可能となる。

【0030】図8は、下記表2に示す3本のコンポーネント波形の複合波形に対し、同図カーブフィッティング設定エリア52に示すように5本の仮コンポーネント波形の初期パラメータ値を設定し、カーブフィッティング処理を行った場合を示す。なお、同図において画面右上には、反復回数を設定する反復回数設定エリア110が設けられており、本実施例においては反復回数が20回と設定されている。従って、反復20回目に、波形パラメータの高さと幅が拘束条件より小さくなった場合には、その拘束条件を割った仮コンポーネント波形を一つ

減らすこととしている。

【 0 0 3 1 】

【表 2】

コンポーネント波形	Height	Position	HWHM	Beta
①	0.80	57.00	8.00	0.20
②	1.00	70.00	10.00	0.00
③	0.70	80.00	9.00	0.50

【 0 0 3 2 】 図 9 には、図 8 おいてエリア 5 2 に設定された 5 本の仮コンポーネント波形 ①' ~ ⑤' とその合成波形 W_1 、原波形 W_1 及びその残差 R が示されている。一方、本実施例にかかるカーブフィッティング法を適用した場合、順次前記 5 本の仮コンポーネント波形が減らされつつ最適化が行われ、この結果図 8 の結果表示エリア 8 2 及び図 1 0 に示すように 3 本のコンポーネント波形 ①'' ~ ③'' が再生される。

【 0 0 3 3 】 以上のように本実施例によれば、反復回数を設定し、該反復回数だけ反復した後、波形パラメータの高さと幅が前記拘束条件設定手段 2 6 で設定された閾値以下となると、前記仮コンポーネント波形の個数を一つ減らすことで、あらかじめ可能性のあるコンポーネント波形を適当数登録しておいても最適のコンポーネント波形のみを選択して推定コンポーネント波形を得ることができる。図 1 1 には本発明の第 3 実施例にかかるカーブフィッティング方法の概略構成が示されている。前記各実施例においては仮コンポーネント波形のパラメータを使用者が任意に設定する例に付いて説明してきたが、本実施例においては、他の波形分離方法と組み合わせたものである。

【 0 0 3 4 】 すなわち、本実施例に用いられる波形分離方法は、図 1 1 に示されるように、

(1) 与えられたデータ点数 N 点の重畳ローレンツ波形 (同図 1 1 (a)) を対象に折り返す (同図 1 1 (b))。

(2) その波形に $2N$ 点の離散的フーリエ変換を施す。この際、実部は対称なインターフェログラム波形 (図 1 1 (c)) となり、虚部はゼロとなる。

(3) 前記実部の対称インターフェログラム波形からデータ点数 n 点の片側インターフェログラムを抽出する (図 1 1 (d))。ただし、元のスペクトルの SN 比が低い場合には、フィルタリングの目的で幅 p ($< N$) 点の矩形アボダイゼーションを、その片側インターフェログラムに施す (図 1 1 (d))。

(4) 以上のようにして得られた片側インターフェログラムデータに自己回帰モデルを適用する。得られた自己回帰係数から分離コンポーネント波形の各パラメータを算出する。

(5) この分離コンポーネント波形の各パラメータを前記第 2 実施例の仮コンポーネント波形のパラメータとし

て設定する。

以上のような本実施例にかかるカーブフィッティング法を実試料に適用した結果を図 1 2 ~ 1 4 に基づき説明する。

【 0 0 3 5 】 まず、図 1 2 には、クロロベンゼンの 3000 cm^{-1} 付近の赤外吸収スペクトルに前記自己回帰モデルを適用し、分離コンポーネント波形 (1)' ~ (13)' を得た。そして、この分離コンポーネント波形の構成要素 Height, Position, HWHM, Beta をそれぞれ得た。しかしながら、この分離コンポーネント波形を合成した結果 W_1 は図 1 3 に示すとおり実波形 W_1 とはかなりずれてお

り、残差も大きい。これに対して、該分離コンポーネント波形の構成要素を前記実施例 2 に示したカーブフィッティング方法の仮コンポーネント波形の各構成要素として設定し、カーブフィッティング処理を行った結果を図 1 2 の結果表示エリア 8 2 及び図 1 4 に示す。同図より明らかなように、残差はきわめて小さくなることが理解される。本発明にかかる方法によれば、図 1 4 に示すような 1 3 本にわたる仮コンポーネント波形のパラメータ設定、固定に当たっても画面上できわめて容易にかつ視覚的に行うことができる。なお、ここではカーブフィッティングパラメータ固定エリア 5 4 は、左のパラメータ設定エリア 5 2 に対応する最初の 7 本だけの部分を表示し、8 本目から 1 3 本目は表示していない。(マウス操作で容易に表示可能)

【 0 0 3 6 】 なお、前記実施例においてはいずれもカーブフィッティング方法について説明したが、これ以外にも多くのパラメータの設定などを行う必要のある最適化方法に対して、本発明を広く適用することができる。また、パラメータの固定方法に関しては本例ではマトリックス状のスイッチアレーを表示してオン、オフさせるようにしたが、パラメータ設定エリアをクリックすることによって、スイッチの形状や色などの物理的変化で見やすくすることも勿論可能である。

【 0 0 3 7 】

【発明の効果】 以上説明したように本発明にかかる最適化方法によれば、複数のパラメータをディスプレイ上に表示・設定するパラメータ設定工程と、前記表示された複数のパラメータのうち一部を指定し、固定するパラメータ固定工程と、それぞれのパラメータに対する制約条件の設定工程と、それらの制約条件をオン、オフを指示

する工程とを備えたことにより、多くのパラメータを扱う最適化の設定を視覚的にかつ容易に行うことが可能となる。

【図面の簡単な説明】

【図 1】本発明の第一実施例にかかる最適化方法の機構図である。

【図 2】前記第一実施例の設定画面の説明図である。

【図 3】前記第一実施例の図示画面の説明図である。

【図 4】前記第一実施例の結果表示画面の説明図である。

【図 5】前記第一実施例の設定画面の他の例の説明図である。

【図 6】前記図 5 に示した設定例による結果の図示画面の説明図である。

【図 7】本発明の第二実施例にかかる最適化方法の機構図である。

【図 8】前記第二実施例の設定画面（結果表示画面）の説明図である。

【図 9】前記第二実施例のサンプルの処理前の図示画面

【図 2】

の説明図である。

【図 10】前記第二実施例による処理結果の図示画面の説明図である。

【図 11】本発明の第三実施例にかかる最適化方法の機構図である。

【図 12】前記第三実施例の設定画面（結果表示画面）の説明図である。

【図 13】前記第三実施例のサンプルの処理前の図示画面の説明図である。

10 【図 14】前記第三実施例による処理結果の図示画面の説明図である。

【符号の説明】

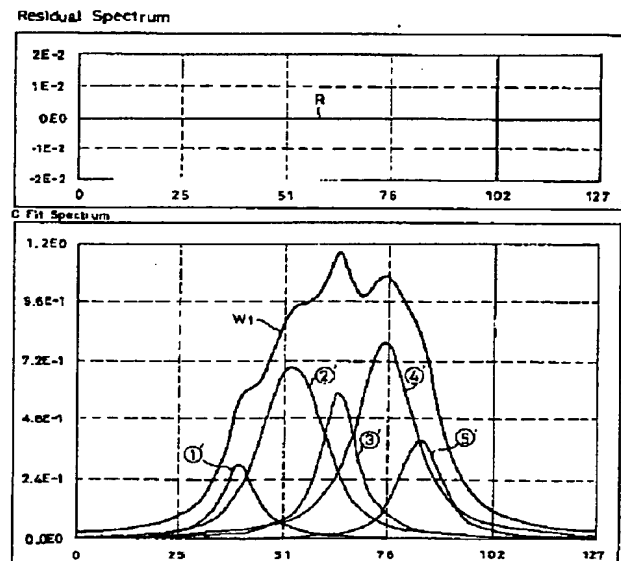
1 4 ディスプレイ

1 8 カーブフィッティングパラメータ設定手段
(パラメータ設定工程)

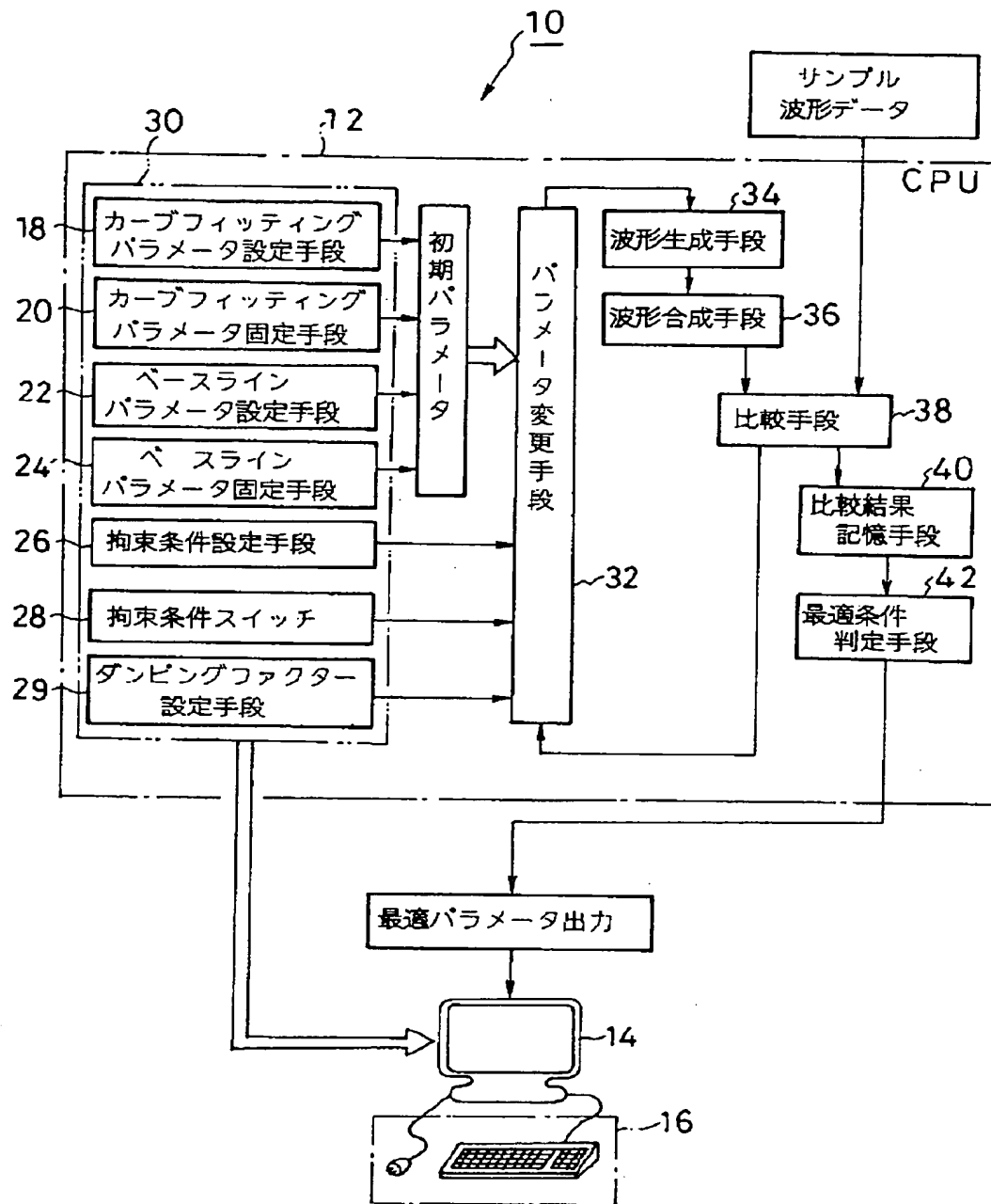
2 0 カーブフィッティング固定手段 (パラメータ
固定工程)

3 2 パラメータ変更手段 (探索工程)

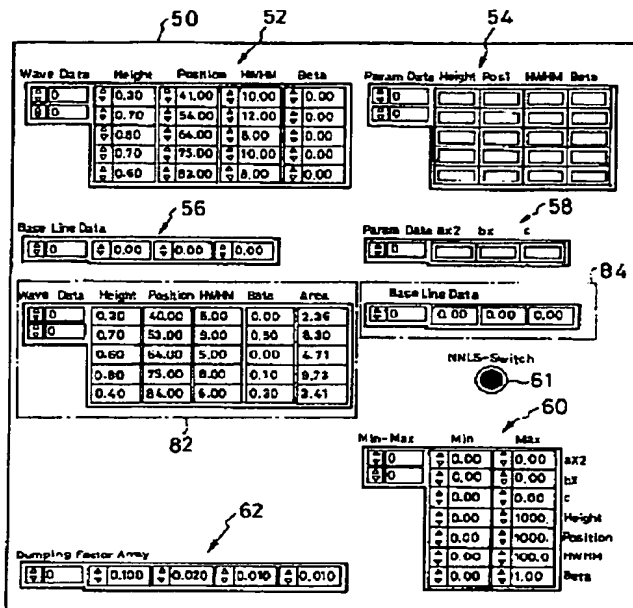
【図 3】



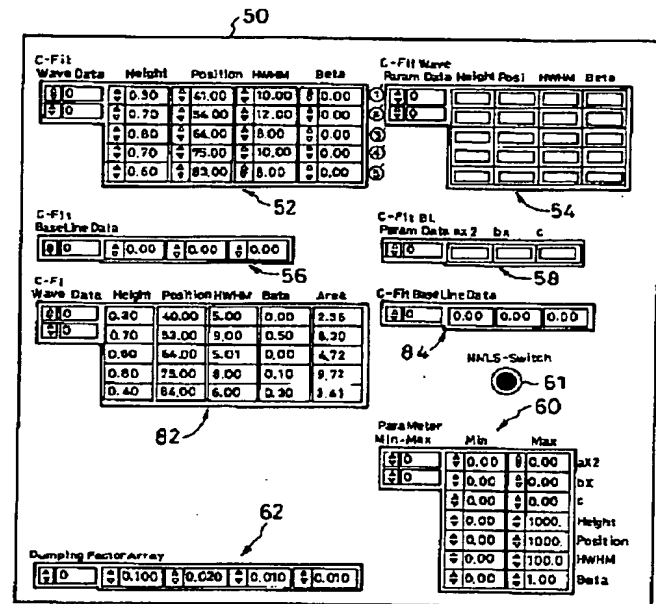
【図 1】



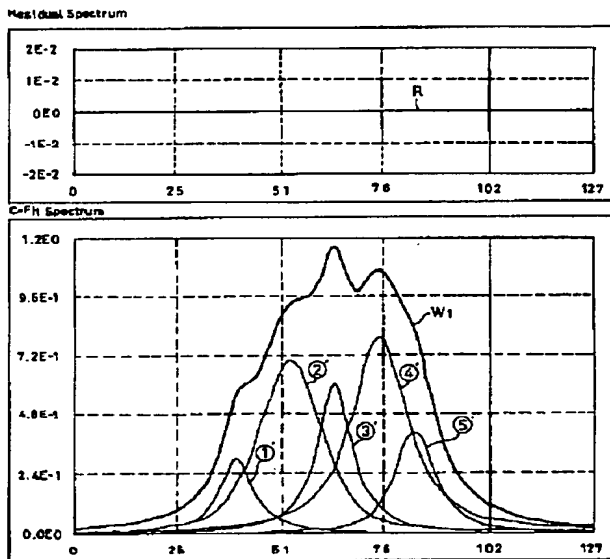
【圖 4】



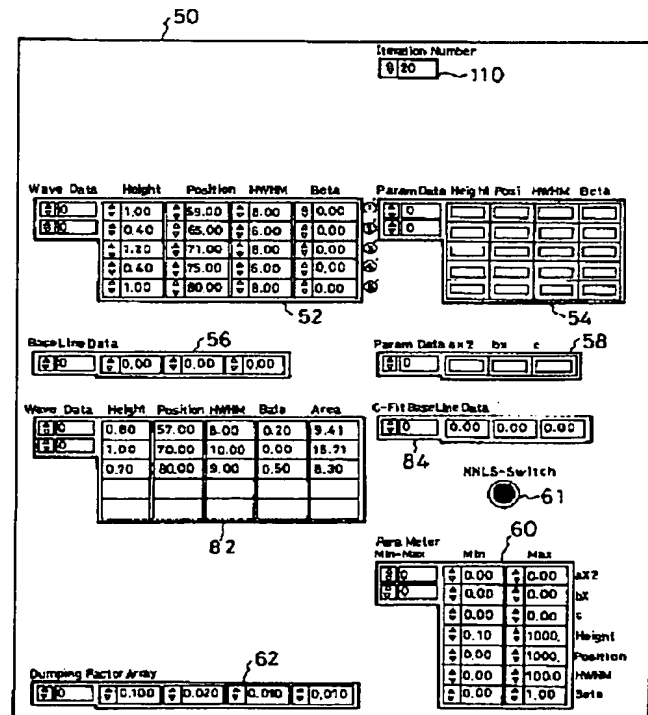
【图 5】



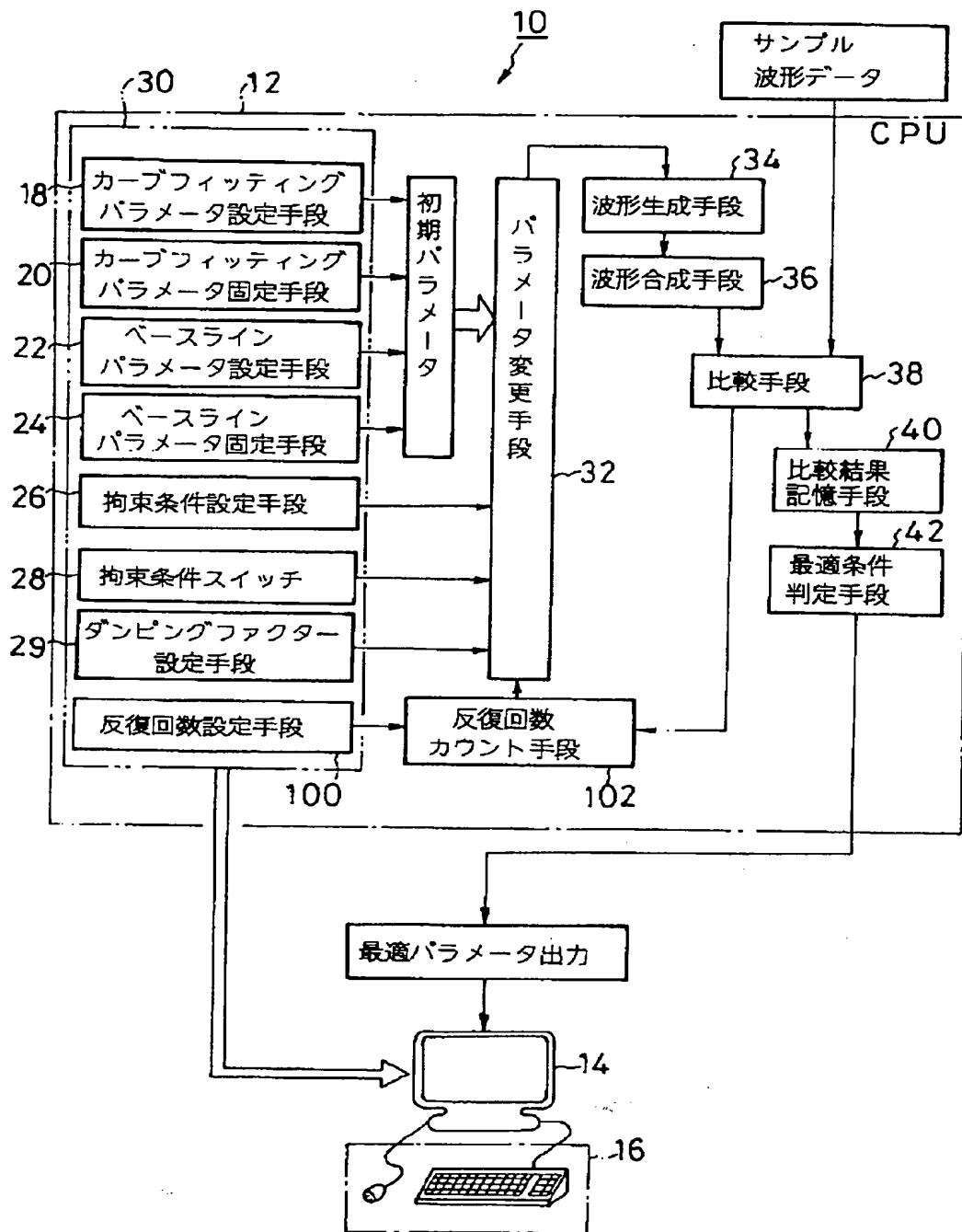
【图 6】



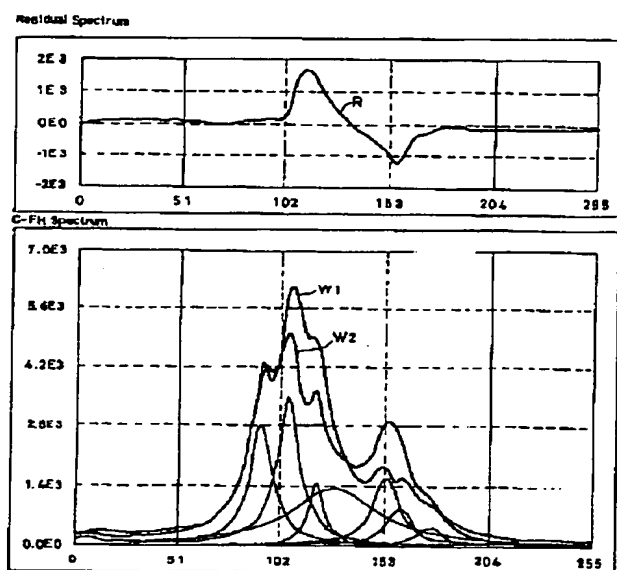
【 例 8 】



【図 7】



【図 13】



【図 14】

